

原子・分子の自在配列と特性・機能
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

塚本 孝政

東京工業大学 科学技術創成研究院
助教

特異的原子配列が創るエキゾチッククラスターの開拓

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、クラスターの原子配列に焦点を当てた独自の理論に基づき、物理的形状や数学的因子に由来して特別な性質を発現する「エキゾチッククラスター」の実験実証や理論拡張を目指す。本年度では、前者の「物理的」エキゾチッククラスターの理論拡張検討として、「ナノ物質の周期表」(超周期表)中のクラスターを高次の元素として見做すことで設計される「高次の分子」についての学理構築と、コンピュータ・シミュレーションによる理論的探索を行なった。このような検討により得られたクラスターの電子状態やエネルギー的安定性について議論することにより、高次構造体の設計論の構築に向けた足がかりを得た。また、後者の「数学的」エキゾチッククラスターの実験実証検討として、「超縮退現象」を発現すると予測される超縮退クラスターの実証に向けた、クラスター前駆体の設計、合成を行なった。結果として、化学的な処理により超縮退クラスターを生成し得る一連の前駆体の合成に成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Modern Cluster Design Based on Experiment and Theory”, Nat. Rev. Chem., vol. 5, pp.338–347, 2021